

宇宙プラズマ計算機シミュレーションの問題解決環境モデル

ヌルディヤナ ガーニ・村田 健史 愛媛大学工学部情報工学科
臼井 英之 京都大学宙空電波研究センター
岡田 雅樹 国立極地研究所
上田 裕子 宇宙開発事業団
大村 善治・松本 紘 京都大学宙空電波研究センター

宇宙プラズマシミュレーションは、スケール長が異なるコードが混在しており、マルチスケール計算の必要性が高まっている。また、コードやアルゴリズムが複雑で、数値不安定性が生じやすい。コードの複雑さのため、開発者以外は、コードを改良し、共同開発を行うことが困難である。コード開発コストや時間を削減し、コードの生産性と利用環境を向上させる PSE 環境が必要とされている。本稿では、モデル設定、パラメータテスト、知識ベース、ジョブ管理、およびデータ可視化を備えた PSE を提案する。提案する PSE では、WWW サーバに、データベースを用いた知識ベースを組み込む。これにより、マルチスケール計算に対応し、知識ベースを利用した数値安定性の予測が可能な環境を実現する。さらに、オブジェクト指向によってコードを開発・実装することにより、WWW 上での初期パラメータおよびモデル設定が可能で、かつ、コードの改良が容易な環境を実現する。

A Model of Problem Solving Environment for Space Plasma Computer Simulations

Nurdiyana binti Abdul Ghani and Ken T. Murata: Faculty of Engineering, Ehime University
Hideyuki Usui: RASC Kyoto University
Masaki Okada: Information Science Center, National Institute of Polar Region
Hiroko O. Ueda: NASDA System Analysis and Software Laboratory
Yoshiharu Omura and Hiroshi Matsumoto: RASC Kyoto University

Due to development of super computers, especially parallel super computers, and high-speed network, roles of computer simulations are getting important. Plasma simulations have contributed a lot to the studies of space plasma, fusion plasma, process plasma and other plasma fields. However, simulation environments have not been kind for researchers who don't program their own simulation codes. We herein propose a new virtual network laboratory system for plasma simulations. This system is composed of front-end WWW server and back-end super computer. With the present system, space plasma simulations become closer to non-programming researchers, and even to general (non research) users.

1. はじめに

宇宙プラズマシミュレーションは、地球を含む太陽系空間 (Geospace) のプラズマ現象を取り扱う。特に、プラズマの不安定性の成長や、非線形現象を解析するのに用いられる。宇宙空間で起こる現象は、人間が直接実験や観測を行うことができない。直接観測が困難な領域において、コンピュータ上で対象をモデル化し、シミュレーションを行うことで、現象を推測することができる。また、人工衛星観測により得られた結果を、計算機シミュレーションによって理解することもある³⁾。宇宙プラズマ現象の研究において、計算機シミュレーションの果た

す役割は大きい。

問題解決環境 (PSE) とは、解決したい問題を、コンピュータを効率的に利用して解くシステムのことである。計算機シミュレーションは、一般に、問題のモデル化、解決手法の選択、差分法などの離散化、プログラミング、計算の実行、データ解析と可視化など、多くのプロセスからなる。PSEでは、これらのプロセスにおいて、ソフトウェア開発のコストや時間を削減し、プログラムの生産性を向上させることを目的とする。特に、シミュレーションコードの複雑化にともない、プログラムレスに計算機シミュレーションを行うことができる環境が望まれている。

現在、宇宙プラズマ計算機実験は、コード開発者が独自にコードの利用、改良を行っており、開発者以外には利用しづらい。宇宙プラズマ計算機シミュレーションにおいても、PSEの必要性が高まっている。本稿では、宇宙プラズマ計算機シミュレーションの特徴問題点を整理し、有効なPSEについて議論と提案を行う。

2. 宇宙プラズマシミュレーションの問題点

現在、宇宙プラズマシミュレーションが抱える問題点は多い。本節では、PSEを導入することによって解決すべき問題点をまとめる。

2.1. マルチスケール計算

多くのプラズマ現象では、ミクロスケールとマクロスケールが混在する。したがって、ミクロスケールとマクロスケールを、一つのコードで統一的に解くことが望ましい。しかし、電子とプロトンの質量比は1,843と大きく、特徴的な空間・時間スケールが異なる。電子の運動論とイオンの運動論を同時に計算することは、現在のスーパーコンピュータをもってしても、困難である。

宇宙プラズマの計算機シミュレーションコードは、計算スケールに応じて多岐にわたる。プラズマを流体として取られるMHDコード、イオンのみ粒子と考えるハイブリッドコード、イオンと電子を粒子としてあつかうフル粒子コード、プラズマの振る舞いを分布関数として計算するブラゾフコードなどである。これらは、後者になるほどミクロスケールを取り扱うコードであり、計算機リソースへの要求も厳しくなる。特に、粒子コードは、超粒子の集合で速度分布関数を近似するため、理論との比較においては、十分な数の粒子が必要となる。

これまで多くの計算では、問題となるスケールに合ったコードを選択し、シミュレーションを行ってきた。現在、複数コード間でデータの受け渡しを行うことによって、マルチスケール計算を行う手法が求められている。

2.2. 数値不安定性

プラズマシミュレーションコードの中でも、特に、粒子シミュレーションコードは、数値不安定性が生じやすい。これは、有限個の超粒子でプラズマを表すため、粒子が希薄な領域が生じたり、粒子の過加速がランダムに発生したりすることにより生じる。このような数値不安定性は、(1)コードに依存した数値不安定性、(2)計算モデルに依存した不安定性、(3)物理パラメータに依存した不安定性、(4)計算パラメータに依存した不安定性などに区別される。コード利用者は、予備知識なしに、選択したパラメータが数値不安定となるかどうかをあらかじめ知ることが望ましい。

2.3. コードの複雑さ

一般に、プラズマシミュレーションコードの内部プログラムは、複雑である。これは、(1)方程式系が複雑であること、(2)数

値安定性を実現するため複雑なアルゴリズムを採用していることが多いこと、などが理由である。特に、粒子コードでは、粒子量と流量の間でデータ交換しながら計算を進めるため、コードはさらに複雑になる。そのため、開発者以外には、コードの共同開発や改良が容易ではない。したがって、たとえば、境界条件や粒子モデルを変更する場合でも、開発者以外がコードの改良を行うことは、まれであった。

2.4. タイムチャートの複雑さ

シミュレーションコードでは、基礎方程式を差分化し、タイムチャートに沿って数値計算していく。一般に、プラズマ粒子シミュレーションコードでは、このように、タイムチャートが複雑である。これは、数値安定性のため、コードごとに、さまざまな工夫をしているからである。タイムチャートの自動作成は容易ではなく、過去、そのような研究はない。

2.5. 結果の予測

プラズマシミュレーションの多くは、理論計算では困難な非線形現象を数値的に解く。非線形現象では、パラメータによって物理的・数値的にまったく予測できない結果を得ることもあり得る。

また、粒子コードでは、分布関数を有限の粒子で表すため、実空間・位相空間で粒子数が減少すると数値誤差が生じる。そのため、計算途中で数値不安定性が生じ、シミュレーションが正常に終了しないこともある。

非線形現象の数値計算結果を予測し、数値不安定性を避けるための理論的、経験的手法が求められている。しかし、これらはコードやモデル、パラメータに依存するため、万能な方法はない。

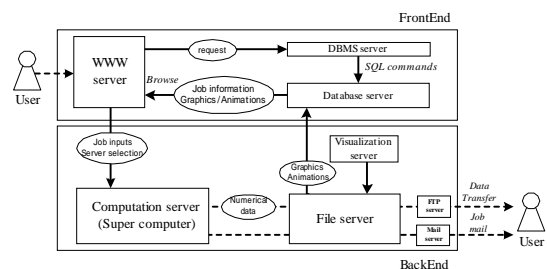


図1 提案するWWW環境

3. 宇宙プラズマシミュレーションのための問題解決環境

3.1. WWW環境の利用

近年、ますます充実しているWWW技術の発展を背景に、本稿では、プラズマシミュレーションのためのPSEとして、WWWを導入する。

本稿で提案するWWW環境を、図2に示す。WWWは、(a)モデル設定、(b)パラメータテスト、(c)データベース検索、(d)ジョブ管理、(e)データ可視化の5点に関するUI環境を提供する。

これら5点を、次節で議論する。

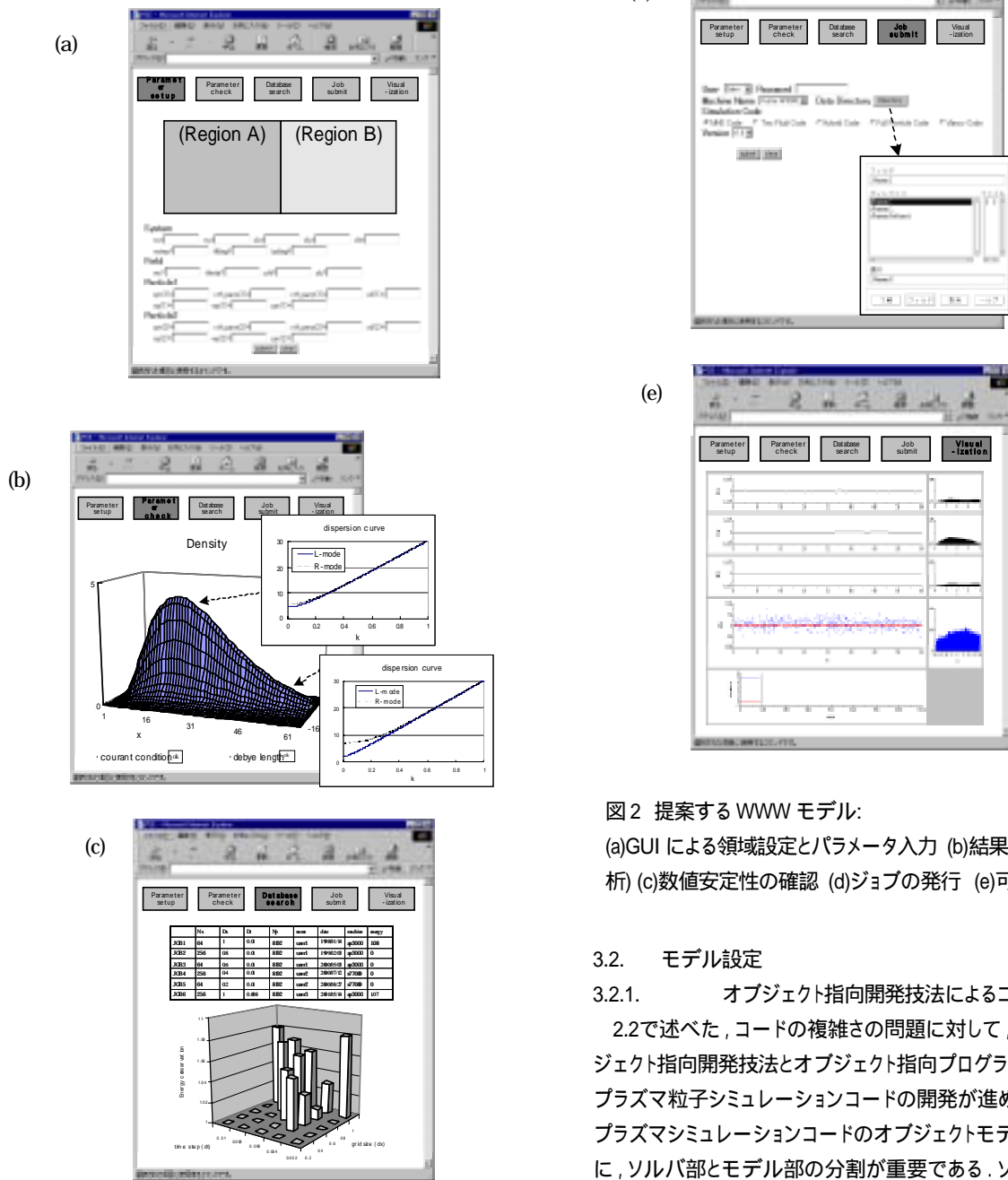


図2 提案する WWW モデル:

(a)GUI による領域設定とパラメータ入力 (b)結果の予測(線形解析) (c)数値安定性の確認 (d)ジョブの発行 (e)可視化

3.2. モデル設定

3.2.1. オブジェクト指向開発技法によるコード開発

2.2で述べた、コードの複雑さの問題に対して、最近、オブジェクト指向開発技法とオブジェクト指向プログラミングによるプラズマ粒子シミュレーションコードの開発が進められている。プラズマシミュレーションコードのオブジェクトモデルでは、特に、ソルバ部とモデル部の分割が重要である。ソルバ部は、差分された基礎方程式群を数値的に計算するルーチン群(クラス群)である。一方、モデル部は、各ルーチンを解く順番、境界条件などを制御する。

オブジェクト指向開発技法の一つであるOMTでは、オブジェクトモデルを、ドメインオブジェクトモデルとアプリケーションオブジェクトモデルに分割する方法を採用している。ドメインオブジェクトモデルは静的モデルであり、アプリケーションオブジェクトモデルは動的モデルである。すなわち、ソルバ部はドメインオブジェクトモデルに対応し、モデル部はアプリケーションオブジェクトモデルに対応する。

したがって、プラズマシミュレーションコードをOMTで開発することにより、ソルバ部とモデル部を分割することが容易である。本研究で作成した、プラズマフル粒子コードのドメインオブジェクトモデルを、図3に示す。3.2.2で述べるように、モデル部とWWWとは相性がよいため、OMTによるプラズマシミュレーションコード開発は有効である。

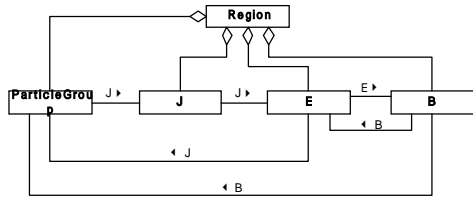


図2 オブジェクト指向フル粒子シミュレーションコードのドメインオブジェクトモデル

3.2.2. シミュレーションモデル設定

プラズマシミュレーションのPSEでは、WWWにおいて初期パラメータとモデルを設定する。モデルは、図2(a)に示すように、シミュレーション領域や粒子の分布、外部および内部境界条件の設定などを、マウス操作によって行う。

たとえば、異なる状態の2つの領域を接合して計算を行う場合を考える。この場合、各領域の位置関係、接合条件などは、初期パラメータ設定は、アプリケーションモデルで実現される。アプリケーションモデルでは、ドメインオブジェクトモデルのプラズマ領域のインスタンスを作成し、パラメータ設定などを行う。WWW上でGUIによるユーザ設定が、アプリケーションモデルと一対一対応している。したがって、環境設定の場合はアプリケーションモデルを変更することになり、コード開発者はドメインモデルを変更することになる。したがって、コード開発者とPSE環境設定を、分離することが可能である。

3.3. パラメータテスト

2.2で述べたように、プラズマシミュレーションコードには、さまざまな数値不安定性が存在する。したがって、ジョブ発行前にパラメータテストを行うことが望ましい。プラズマシミュレーションでは、(1)クーラン条件、(2)デバ依長条件、(3)線形成長率や分散関係、(4)初期平衡状態の確認、などを、あらかじめ知ることができる。WWW上で、これらのパラメータをテスト、または図示することができる(図2(b))。

3.4 知識ベース利用

知識ベースとは、対象問題が与えられたときに、その問題を解釈し、その問題を解くための最適な計算手法または既存ツールを推測・助言し、既存ツールに対して最適な入力パラメータを選択し、さらに計算結果を評価するものである。

プラズマシミュレーションでは、計算手法とコードは一

体化している。問題が定義されたとき、計算方法や用いるツールはほぼ一意に決定される。しかし、問題に対する最適な入力パラメータ設定や計算結果の評価を、PSEを通じて行うことは有効である。本稿では、データベースを用いて、最適な入力パラメータの設定を行うPSEを提案する。

多くのシミュレーションでは、同じモデルに対して、パラメータサーベイを行う。たとえば、非線形現象のシミュレーションでは、計算結果が数値誤差に依存しないことを確認しなくてはならない。多くの場合、より精度の高い計算を行い、結果が定性的、定量的に等しくなることによって、数値誤差の影響がないことを確認する。しかし、精度の高い計算を行うことにより、逆に、数値不安定性が発生することもある。たとえば、時間ステップを小さくすると、計算精度は向上するが、総ステップ数が増えるために、1ステップに発生する誤差の積分値が増大するからである。したがって、効率的なパラメータサーベイが必要となる。

パラメータサーベイにおいて、有効な手段の一つは、過去の計算履歴をデータベース化し、それらより、最適なパラメータを選択することである。プラズマシミュレーションの最適パラメータ推測・抽出は、これまでに有効な手法が提案されていない。たとえば、周期境界モデルにおいては、各パラメータとエネルギーをデータベースより抽出し、可視化することで、最適パラメータの設定に役立てることが考えられる(図2(c))。

3.5 ジョブの管理

WWWサーバと並列計算機などの計算サーバは、一般的に、ネットワークで接続された異なる計算機となる。そのため、WWWサーバは、リモートシェル等により、計算サーバにジョブを発行する形で数値計算を行う(図2(d))。

マルチスケール計算は、ジョブ発行時にWWW上で複数のコードを選択することにより実現する。たとえば、マクロスケールコードによって計算した結果を、ミクロスケールの初期パラメータとして用いる。さらに、ミクロスケール計算結果を、マクロスケール計算の初期パラメータとして利用する。異なるスケールのコード間でデータのやり取りを行うためには、統一した規格化手法と近似方法が必要となる。

3.6 データ可視化

WWW上でシミュレーション結果を可視化するのは、Java言語等を用いれば、容易である(図2(e))。異なるシミュレーションコード間で統一した可視化環境を提供するためには、コード間での出力データフォーマットの統一が必要となる。これまで、netCDF、HDF等のフォーマットなどの統一データフォーマットが提案されている。